

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

**IX КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА**
Изводи радова

**IX CONFERENCE
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY**
Abstracts

БЕОГРАД – BELGRADE
2001

ISSN 0354-5741

СРПСКО КРИСТАЛОГРАФСКО ДРУШТВО

SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY

IX КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

IX CONFERENCE
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

БЕОГРАД – BELGRADE
2001

IX КОНФЕРЕНЦИЈА СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Изводи радова

IX CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Abstracts

Издавач - Publisher

- Српско Кристалографско Друштво,

Ђушина 7, 11000 Београд, Југославија, тел./факс: 635 – 217

- Serbian Crystallographic Society

Đušina 7, 11000 Beograd, Yugoslavia, phone/fax: 381 – 11 – 635 – 217

За издавача – For the publisher

Љиљана Карановић – Ljiljana Karanović

Технички уредник – Technical editor:

Агнеш Капор – Agneš Kapor

Оливера Марковић – Olivera Marković

Издавање ове публикације омогућено је финансијском помоћи Интернационалне
уније за кристалографију

This publication is financially supported by International Union of Crystallography

© Српско Кристалографско Друштво – Serbian Crystallographic Society

ISSN 0354-5741

Штампа – Printing:

“LINK”

Novi Sad, Futoška 38

“LINK”

Novi Sad, Futoška 38

Тираж – Copies: 100

Нови Сад – Novi Sad

2001

**IX КОНФЕРЕНЦИЈА
СРПСКОГ КРИСТАЛОГРАФСКОГ ДРУШТВА
Нови Сад, 20. – 22. 9. 2001**

**IX CONFERENCE
OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY
Novi Sad, 20. – 22. 9. 2001**

НАУЧНИ ОДБОР / SCIENTIFIC COMMITTEE:

- S. Stanković, PMF, Novi Sad
- A. Kapor, PMF, Novi Sad
- V. Leovac, PMF, Novi Sad

ОРГАНИЗАЦИОНИ ОДБОР / ORGANIZING COMMITTEE:

- S. Stanković, PMF, Novi Sad
- D. Lazar, PMF, Novi Sad
- O. Marković, PMF, Novi Sad

CONTENTS – САДРЖАЈ

PLENARY LECTURES – ПЛЕНАРНА ПРЕДАВАЊА

<u>S. Stanković</u> CRYSTALLOGRAPHY AND STRUCTURAL BIOLOGY: STRUCTURE – ACTIVITY RELATIONSHIP	2
<u>S. Stanković</u> KRISTALOGRAFIJA U STRUKTURNOJ BIOLOGIJI: VEZA IZMEĐU STRUKTURE I AKTIVNOSTI	6
<u>S. Zarić</u> STADY OF NONCOVALENT INTERACTIONS BY SEARCHING CRYSTAL STRUCTURES IN DATA BANKS	10
<u>S. Zarić</u> PROUČAVANJE NEKOVALENTNIH INTERAKCIJA PRETRAŽIVANJEM KRISTALNIH STRUKTURA U BANKAMA PODATAKA	11

ORAL PRESENTATIONS – САОПШТЕЊА

<u>D. Lazar, S. Stanoković, O. Marković, E. Đurendić, M. Sakač, T. Pilati</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 3 β -HYDROXY-17-PICOLINYLIDENE-5 α - ANDROSTANE	14
<u>D. Lazar, S. Stanoković, O. Marković, E. Đurendić, M. Sakač, T. Pilati</u> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 3 β -HIDROKSI-17-PIKOLINILIDEN-5 α -ANDROSTANA ...	15
<u>O. Marković, S. Stanković, D. Lazar, Ch. Courseille, E. Đurendić, Lj. Medić-Mijačević</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE INVESTIGATIONS OF TWO ANDROSTENE DERIVATIVES	16
<u>O. Marković, S. Stanković, D. Lazar, Ch. Courseille, E. Đurendić, Lj. Medić-Mijačević</u> SINTEZA, STRUKTURNA I KRISTALOGRAFSKA ISTRAŽIVANJA DVA DERIVATA ANDROSTENA	17
<u>S. Novaković, G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo</u> SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF S-CIS-(ETHYLENDIAMINE-N, N'-DIACETATO) (N, N-DIMETHYLGLYCINATO)COBALT(III).....	18
<u>S. Novaković, G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo</u> SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA S-CIS-(ETILENDIAMIN-N, N'-DIACETATO) (N, N- DIMETILGLICINATO)KOBALTA(III)	19
<u>G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo, A. Spasojević – de Brić</u> CRYSTAL STRUCTURE OF TRANS-DIBROMO(1,3-PROPYLENEDIAMINE-N,N'-DIACETATO) PLATINUM(IV)MONOHIDRATE.....	20

G. A. Bogdanović, V. Đinović, T. J. Sabo, A. Spasojević – de Brié KRISTALNA STRUKTURA TRANS-DIBROMO(1,3-PROPILENDIAMIN-N,N'-DIACETATO) DIBROMOPLATINA(IV)-MONOHIDRATA.....	21
A. Spasojević – de Brié, A. Kremenović, N.-E. Ghermani, P. Hubberstey CRYSTAL STRUCTURE OF A COPPER(I) CYANO GUANIDINE COMPLEX.....	22
A. Spasojević – de Brié, A. Kremenović, N.-E. Ghermani, P. Hubberstey KRISTALNA STRUKTURA JEDNOG BAKAR(I) KOMPLEKSA CIJANO GVANIDINA.....	23
A. Kapor, D. Zobel, M. Strümpel, Lj. Torović, M. Popsavin CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF E-FORM OF UNSATURATED ESTERS OF C-NUCLEOSIDES.....	24
A. Kapor, D. Zobel, M. Strümpel, Lj. Torović, M. Popsavin KRISTALNA I MOLEKULSKA STRUKTURA E-FORME NEZASIĆENOG ESTRA C-NUKLEOZIDA.....	25
A. A. Žekić, M. M. Mitrović IMPROVEMENT OF INITIAL CRYSTAL GROWTH CONDITIONS BY DISSOLUTION AND REFACETING.....	26
A. A. Žekić, M. M. Mitrović UJEDNAČAVANJE POČETNIH USLOVA RASTA KRISTALA RASTVARANJEM I REFACETIRANJEM.....	27
Z. D. Tomić, G. A. Bogdanović, Ž. Jaćimović, V. Leovac CRYSTAL AND MOLECULAR STRUCTURE OF THE DICHLORO-TRIS(3-AMINO-5- PHENYLPYRAZOLE)ZINC(II) COMPLEX.....	28
Z. D. Tomić, G. A. Bogdanović, Ž. Jaćimović, V. Leovac KRISTALNA I MOLEKULSKA STRUKTURA DIHLORO-TRIS(3-AMINO-5- FENILPIRAZOL)CINK(II).....	29
G. A. Bogdanović, V. S. Jevtović, V. M. Leovac, A. Spasojević-de Biré CRYSTAL STRUCTURE OF AQUA(PYRIDOXALTHIOSEMICARBAZONATO) COPPER(II)BROMIDE, [Cu(L-H)H ₂ O]B.....	30
G. A. Bogdanović, V. S. Jevtović, V. M. Leovac, A. Spasojević-de Biré KRISTALNA STRUKTURA AKVA(PIRIDOKSALTIOSEMIKARBAZONATO) BAKAR(II)BROMIDA, [Cu(L-H)H ₂ O]B.....	31
P. Tančić, V. Janežić ALUNITE AND NATROALUNITE FROM VELIKI BUKOVIK.....	32
P. Tančić, V. Janežić ALUNIT I NATROALUNIT SA VELIKOG BUKOVIKA.....	33
P. Tančić, R. Dimitrijević, V. Janežić ARSENO PYRITES FROM SOME ORE DEPOSITS OF SERBIA.....	34

P. Tančić, R. Dimitrijević, V. Janežić ARSENOPIRITI IZ NEKIH RUDNIH LEŽIŠTA SRBIJE	35
B. Antić, N. Jović, M. Mitrić, A. Kremenović, A. Spasojević – de Brić, D. Rodić REFINEMENT OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF $\text{Li}_{1.33-0.665x}\text{Co}_x\text{Ti}_{1.67-0.335x}\text{O}_4$ IN TWO SPACE GROUPS AT TWO WAVELENGTHS.....	36
B. Antić, N. Jović, M. Mitrić, A. Kremenović, A. Spasojević – de Brić, D. Rodić UTAČNJAVANJE KRISTALNE STRUKTURE $\text{Li}_{1.33-0.665x}\text{Co}_x\text{Ti}_{1.67-0.335x}\text{O}_4$ U DVE PROSTORNE GRUPE SA DVE TALASNE DUŽINE	37
D. Rodić, J. Blanuša, M. Mitrović, B. Antić CRYSTAL AND MAGNETIC STRUCTURE OF $\text{Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$ SOLID SOLUTIONS	38
D. Rodić, J. Blanuša, M. Mitrović, B. Antić KRISTALNA I MAGNETNA STRUKTURA ČVRSTIH RASTVORA $\text{Fe}_{2-x}\text{Cr}_x\text{O}_3$	39
Á. Bordás, A. Kapor PAIR DISTRIBUTION FUNCTION AND THE LOCAL STRUCTURE OF DISORDERED MATERIALS.....	40
Á. Bordás, A. Kapor FUNKCIJA RASPODELE PAROVA I LOKALNA STRUKTURA NEUREĐENIH MATERIJALA	41
A. Janićijević, B. Čabrić CRUCIBLE FURNACE FOR OBTAINING CRYSTALS.....	42
A. Јанићијевић, Б. Чабрић ТИГЛ ПЕЋ ЗА ДОБИЈАЊЕ КРИСТАЛА	43
B. Čabrić, A. Janićijević A CHAMBER FURNACE FOR OBTAINING CRYSTALS	44
B. Чабрић, А. Јанићијевић КОМОРНА ПЕЋ ЗА ДОБИЈАЊЕ КРИСТАЛА	45
D. Poletić, Lj. Karanović, J. Rogan A NEW POLYMERIC COBALT(II) COMPLEX CONTAINING TEREPHTHALATE IONS AND 1,10- PHENANTHROLINE	46
D. Poletić, Lj. Karanović, J. Rogan NOVI POLIMERNI KOBALT(II) KOMPLEKS SA TEREFTALAT-JONIMA I 1,10- FENANTROLINOM.....	47
A. Rosić, I. Petrović-Prelević, D. Jovanović X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS IN THE VEGETABLE FAT POLYMORPHISM STUDY – STARTING COMPONENTS	48
A. Rosić, I. Petrović-Prelević, D. Jovanović ISPITIVANJE POLIMORFIZMA BILJNIH MASTI RENDGENSKOM DIFRAKCIJOM – POLAZNE KOMPONENTE	49

<u>A. Kapor</u> , M. Vučinić, S. Rakić, V. Nikolić STRUCTURAL CHARACTERISATION OF THE ALICINE COMPLEX WITH β -CYCLODEXTRINE AND UREA	50
<u>A. Kapor</u> , M. Vučinić, S. Rakić, V. Nikolić STRUKTURNA KARAKTERIZACIJA KOMPLEKSA ALICINA SA β -CIKLODEKSTRINOM I UREOM	51
<u>O. Marković</u> , D. Lazar, S. Stanković, M. Sakač, O. Arcson, T. Pilati SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE OF 4-SOLANIDENE-3-ONE	52
<u>O. Marković</u> , D. Lazar, S. Stanković, M. Sakač, O. Arcson, T. Pilati SINTEZA I KRISTALNA STRUKTURA 4-SOLANIDEN-3-ONA	53
<u>S. Stanković</u> , D. Lazar, O. Marković, K. Penov-Gaši, M. Sakač, T. Pilati SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURE INVESTIGATIONS OF TWO ANDROSTANE DERIVATIVES	54
<u>S. Stanković</u> , D. Lazar, O. Marković, K. Penov-Gaši, M. Sakač, T. Pilati SINTEZA, KRISTALOGRAFSKA I STRUKTURNA ISTRAŽIVANJA DVA DERIVATA ANDROSTANA	55
IN MEMORIAM: Др ДУБРАВКО РОДИЋ	57
IN MEMORIAM: DR DUBRAVKO RODIĆ	59

ARSENOPYRITES FROM SOME ORE DEPOSITS OF SERBIA

P. Tančić^a, R. Dimitrijević^b, V. Janežić^a

^aGeoinstitut, Rovinjska 12, Belgrade, Yugoslavia; ^bRGF, Ćušina 7, Belgrade, Yugoslavia;
e-mail: geoins@EUnet.yu

Arsenopyrites from five Serbia's ore deposits: Crveni Breg, Rudnik, Sastavci, Belo Brdo and Trepča, were investigated by X-ray method. By the programme's help TREOR 90 [1] it was tested their symmetry and by this occasion for all samples were obtained monoclinic solutions. Afterwards throughout LSUCRIPC programme [2] it were calculated in the space group P2₁/c unit cell dimensions, and those are together with characteristic interplanar spacings d_{131} (sensitive to As/S relation [3]) represented at the Table 1. From these datas which were obtained by X-ray diffraction, and after calculations in regression expressions [4] and [5], there were obtained average values of As and S (in at. %), and then were calculated relation As : S. Then there were calculated crystallochemical formulas on the basis of [4] and [6]. These results are represented at the Table 2. Mutually, differences and characteristics with regard to their chemistry and crystallographic parameters, and also to formation of arsenopyrites are obviously, which is in accordance with different origin of their main ore deposits [7].

Table 1. Calculated unit cell dimensions and observed d_{131} values.

	Crveni Breg	Rudnik	Sastavci	Belo Brdo	Trepča
a_0 (Å)	5.7534(8)	5.7443(9)	5.745(2)	5.737(2)	5.754(1)
b_0 (Å)	5.690(1)	5.683(1)	5.676(2)	5.652(2)	5.654(2)
c_0 (Å)	5.7927(9)	5.781(1)	5.767(2)	5.771(2)	5.776(2)
β_0 (°)	112.34(1)	112.23(1)	112.10(2)	111.84(2)	111.95(2)
V_0 (Å ³)	175.21(8)	174.62(8)	174.3(2)	174.1(1)	174.6(1)
d_{131} obs (Å)	1.6325(4)	1.6317(4)	1.6313(1)	1.6292(4)	1.6285(7)

Table 2. Calculated average values As and S (in at.%) from equations [4] i [5], relation As:S and estimated crystallisation temperature [4] and [6].

	Crveni Breg	Rudnik	Sastavci	Belo Brdo	Trepča
av. vel. As/S	36.2 / 29.8	33.2 / 33.7	31.3 / 36.1	29.0 / 38.7	31.7 / 35.1
As : S	1.21	0.98	0.87	0.75	0.90
cris. formula	FeAs _{1.09} S _{0.91}	FeAs _{0.99} S _{1.01}	FeAs _{0.94} S _{1.06}	FeAs _{0.87} S _{1.13}	FeAs _{0.95} S _{1.05}
[6] / [4] (°C)	≈430/≈510	≈380/≈490	≈360/≈475	≈250/≈350	≈210/≈355

- [1] P. E. Werner, L. Eriksson and M. Westdahl, *J. Appl. Cryst.*, 18 (1985), p. 367 – 370.
 [2] R. Garvey, Least-square unit cell refinement. Version 86,2, Dept. of Chemistry, North Dakota State University, (1987).
 [3] N. Morimoto and L. A. Clark, *Am. Min.*, 46 (1961), p. 1448 – 1469.
 [4] U. Kretschmar and S. D. Scott, *Canad. Min.*, 14 (1976), p. 364 – 386.
 [5] E. Tjukova i T. Mahorkina, *Zapiski Vsenoznogo Mineralogičeskogo Obšestva*, Vipusk 1, 119 (1990), p. 93-97.
 [6] L. A. Clark, *Econ. Geol.*, 55 (1960a,b), p. 1345-1381 i 1631-1652.
 [7] R. S. Janković, *Rudna ležišta Srbije: Regionalni metalogenetski položaj, sredine stvaranja i tipovi ležišta*, Beograd (1990).

ARSENOPIRITI IZ NEKIH RUDNIH LEŽIŠTA SRBIJE

P. Tančić^a, R. Dimitrijević^b, V. Janežić^a

^aGeoinstitut, Rovinjska 12, Beograd, Jugoslavija; ^bRGF, Čušina 7, Beograd, Jugoslavija
e-mail: geoins@EUnet.yu

Rendgenski su ispitivani arsenopiriti iz pet rudnih ležišta Srbije: Crveni Breg (Avala), Rudnik (Rudnik), Sastavci, Belo Brdo i Trepča (Kopaonik). Pomoću programa TREOR 90 [1] testirana je njihova simetrija i tom prilikom su za sve uzorke dobijena monoklinična rešenja. Zatim su pomoću programa LSUCRIPC [2] izračunate u prostornoj grupi $P2_1/c$ dimenzije jediničnih ćelija, koje su zajedno sa karakterističnim međupljosnim rastojanjima refleksija d_{131} osjetljivim na odnos As/S [3], prikazane u Tabeli 1. Iz ovih podataka dobijenih rendgenskom difrakcijom, a posle preračunavanja u regresionim izrazima [4] i [5], dobijene su srednje vrednosti As i S (u at.%) i izračunat je odnos As : S, a zatim su preračunate i kristalohemijske formule na osnovu radova [4] i [6]. Ovi rezultati su prikazani u Tabeli 2. Međusobne razlike i karakteristike, kako u pogledu hemizma, kristalografskih parametara, tako i u pogledu geneze arsenopirita, su očigledne, što je u skladu sa različitim nastankom matičnih ležišta [7].

Tabela 1. Izračunate dimenzije jediničnih ćelija i izmerene d_{131} vrednosti.

	Crveni Breg	Rudnik	Sastavci	Belo Brdo	Trepča
a_0 (Å)	5,7534(8)	5,7443(9)	5,745(2)	5,737(2)	5,754(1)
b_0 (Å)	5,690(1)	5,683(1)	5,676(2)	5,652(2)	5,654(2)
c_0 (Å)	5,7927(9)	5,781(1)	5,767(2)	5,771(2)	5,776(2)
β_0 (°)	112,34(1)	112,23(1)	112,10(2)	111,84(2)	111,95(2)
V_0 (Å ³)	175,21(8)	174,62(8)	174,3(2)	174,1(1)	174,6(1)
d_{131} obs (Å)	1,6325(4)	1,6317(4)	1,6313(1)	1,6292(4)	1,6285(7)

Tabela 2. Izračunate srednje vrednosti As i S (u at.%) iz jednačina [4] i [5], odnos As:S, preračunate kristalohemijske formule i procenjene temperature kristalizacije [4] i [6].

	Crveni Breg	Rudnik	Sastavci	Belo Brdo	Trepča
sr.vr. As/S	36,2 / 29,8	33,2 / 33,7	31,3 / 36,1	29,0 / 38,7	31,7 / 35,1
As : S	1,21	0,98	0,87	0,75	0,90
kr. formula	FeAs _{1,09} S _{0,91}	FeAs _{0,99} S _{1,01}	FeAs _{0,94} S _{1,06}	FeAs _{0,87} S _{1,13}	FeAs _{0,95} S _{1,05}
[6] / [4] (°C)	≈430/≈510	≈380/≈490	≈360/≈475	≈250/≈350	≈210/≈355

- [1] P. E. Werner, L. Eriksson and M. Westdahl, *J. Appl. Cryst.*, 18 (1985), str. 367 – 370.
 [2] R. Garvey, Least-square unit cell refinement. Version 86,2, Dept. of Chemistry, North Dakota State University, (1987).
 [3] N. Morimoto and L. A. Clark, *Am. Min.*, 46 (1961), str. 1448 – 1469.
 [4] U. Kretschmar and S. D. Scott, *Canad. Min.*, 14 (1976), str. 364 – 386.
 [5] E. Tjukova i T. Mahorkina, *Zapiski Vsenoznogo Mineralogičeskogo Obšestva*, Vipusk 1, 119 (1990), str. 93-97.
 [6] L. A. Clark, *Econ. Geol.*, 55 (1960a,b), str. 1345-1381 i 1631-1652.
 [7] R. S. Janković, *Rudna ležišta Srbije: Regionalni metalogenetski položaj, sredine stvaranja i tipovi ležišta*, Beograd (1990).